

Auswertung von Versuch FP43: Raman-Spektroskopie

Coc, Q'inich and Huth, Paris

January 2025

1 Charakterisierung des Raman-Kantenfilters

Im ersten Teil des Versuchs messen wir die Abhängigkeit der Photodiodenspannung zum Einfallswinkel. Die Messreihe wird in Fig. 1 geplottet. Zusätzlich wird ein linear Fit an den Flanken der Kurve angepasst.

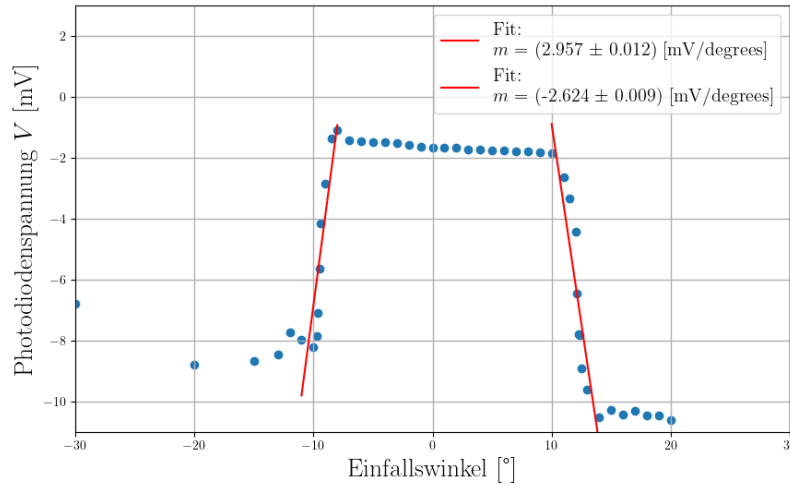


Figure 1: Gemessene Abhängigkeit der Photodiodenspannung zur Einfallswinkel (blue Punkte) zusammen mit Linear-Fit der Flanken der Kurve.

Während der Durchführung dieses Versuchsteils, merken wir, dass der Laser nicht stabil ist, denn die Intensität des Lasers signifikant abnimmt zum Punkt wo keine Messungen nehmen werden können. Unser Betreuer kann erfolgreich das Fehler lösen.

Um die Cut-on Winkeln aus diesem Diagramm zu ermitteln, passen wir einen letzten Fit an der Plateau der Kurve. Zunächst rechnen wir den Schnittstellen den Flankenfits mit diesem letzten Fit. Wir schätzen folgende Cut-On-Winkeln:

$$\vartheta_1 = -8.18(17)^{\circ}$$

$$\vartheta_2 = 10.36(21)^\circ$$

Als zweite Schritt, messen wir die Abhängigkeit der Zählrate zur angelegten Beschleunigungsspannung U_B um die s.g. PMT-Kennlinie darzustellen. Während der Durchführung dieses zweiten Versuchsteils treten erneut Fehlern bei der Messungen, die aufgrund die Instabilität des Lasers erzeugen werden. Der fehlerhafte Verhältnis des Lasers kann deutlich in Fig. 2a beobachtet werde. In dieser Diagramm sind unser Messungen zu sehen, welche signifikant von die Erwartungen abweichen. Die Problemen beim Laser sind zu komplex, und das Gerät kann nicht schnell genug repariert werden, damit wir weitere Messungen nehmen können. Auf diesen Grund, bekommen wir alten Messwerte vom unseren Betreuer um die Auswertung des Versuch durchzuführen.

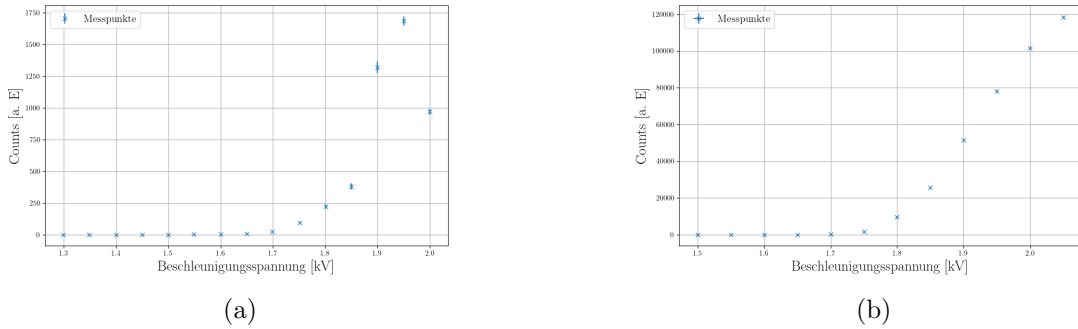


Figure 2: PMT-Kennlinie. Abhängigkeit der Zählrate zur angelegten Beschleunigungsspannung. a) Messreihe mit fehlerhaften Laser. b) Messreihe mit funktionsfähigen Laser (alte Messwerten vom Betreuer erhalten).

In Fig. 2b wird die PMT-Kennlinie des verwendeten Raman-Filter dargestellt. Aus diesem Diagramm können wir merken, dass im Bereich 1.8–2.0 kV die Zählrate ein linear Verhältnis zur U_B zeigt. Um sinnvolle Messungen zu nehmen muss das Signal zu Dunkelstrom Verhältnis maximiert werden. Daher können wir ein Spannung $U_B = 2.0$ kV als eine gute Wahl angeben.

2 Raman-Spektrum

In diesen Versuchsteil untersuchen wir die Raman-Spektrum von normales-, para-Wasserstoff, Deuterium, Sauerstoff und Stickstoff. Zu jeden Messreihe gehört ein gemessenen Untergrundspektrum welche von die Spektrum abgezogen werden muss, um die Zählrate der ausgestreuten Photonen zu isolieren.

2.1 Rotationsspektrum von Deuterium

Aus dem gemessenen Deuterium-Spektrum, Fig. 3, können wir vier Raman-Linien beobachten. Um die gefundene Linien benenne zu können, müssen wir zum erste die er-

wartete Wellenlängennummer der Linien bestimmt werden.

Die Bestimmung der erwartete der Position der Raman-Linien wird mit der Literaturwerten der Masse von Deuterium und dem Atomabstand eines Deuteriummoleküls D_2 durchgeführt:

$$m_D = 2.015\,88\,\text{u}$$

$$r_{D_2} = 74\,\text{pm}.$$

Diese werte können an der Gleichung

$$B = \frac{h}{8\pi^2 c \mu r^2} \quad (1)$$

eingesetzt werden um die erwartete Rotationskonstante zu bestimmen. Hier h entspricht die Planck'sche Konstant, c die Lichtgeschwindigkeit und μ die reduzierte Masse:

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}. \quad (2)$$

Da wir mit homogenen Moleküle arbeiten, gilt $m_1 = m_2$ und Gl. 2 vereinfacht sich:

$$\mu = \frac{1}{2}m \quad (3)$$

Wir finden:

$$B_{lit}^{D_2} = 30.57\,\text{cm}^{-1}.$$

Die Wellenlängennummer der Rotationsanregungen wird durch

$$\bar{\nu}_{rot,J} = B(4J + 6) \quad (4)$$

gegeben. Und die Wellenlängennummer der Raman-Linie kann durch

$$\bar{\nu}_{J \rightarrow J+2} = \bar{\nu}_{Laser} \pm \bar{\nu}_{rot,J} \quad (5)$$

ermittelt werden. In unser Experiment gilt:

$$\bar{\nu}_{Laser} = 18\,691.59\,\text{cm}^{-1}$$

Um die Position der gemessenen Raman-Linien quantitative betrachten zu können, passen wir eine Voigt-Distribution an der einzelne erkennbare Peaks an. Die Voigt-Distributoin ist durch die Faltung einer Gauß- und einer Breit-Wigner Distribution definiert. Die Messwerte und die Fit-Funktion werden in Fig. 3 dargestellt.

Durch Vergleich der gemessenen und erwarteten Position der Linien, können wir die gemessenen Raman-Linien als die erste 4 Rotationsanregungen erkennen. Die gefundene und erwartete Werten werden in Tab. 1 zusammengefasst und vergleicht.

Durch Bestimmung des Abstandes zwischen der Peaks können wir die Rotationskonstante von Deuterium bestimmen indem wir Gl. 4 verwenden. Durch dieser Art und Weise

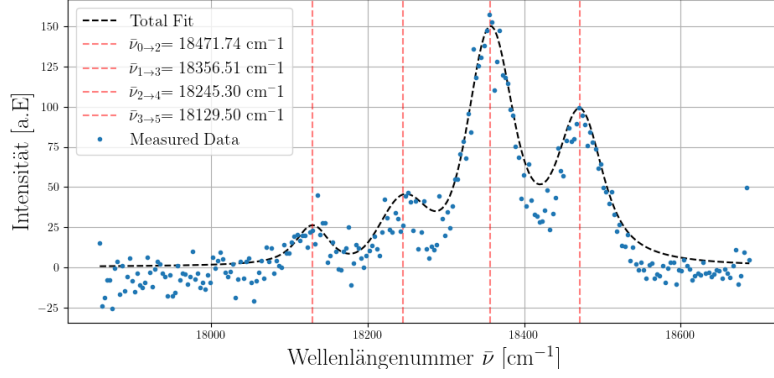


Figure 3: Raman-spectrum von Deuterium. Gemessenen Spektrum eine Deuterium Probe nach Untergrundabzug (blaue Punkte) mit Fit-Funktion, welche aus der Summe einzelnen Voigt-Fits besteht (schwarze Linie). Die gefundenen Raman-Linien sind durch gestrichelte rote Linien markiert.

Table 1: Wellenlängennummer der Raman-Linien von D_2 . Vergleich von erwartete und gemessene Werte.

J	$\bar{\nu}_{J \rightarrow J+2} [\text{cm}^{-1}]$		Abweichung σ
	gemessen	erwartet	
0	18471.7 ± 1.1	18507.17	33.4
1	18356.5 ± 0.9	18385.88	31.3
2	18245 ± 3	18263.60	6.5
3	18129 ± 4	18141.32	3.22

können wir 3 Werte berechnen für B abschätzen. Als Endergebnisse werden den Mittelwert und der zugehörige Standardabweichung verwendet:

$$B_{exp}^{D_2} = 28.5(5) \text{ cm}^{-1}.$$

Wir beobachten eine signifikante Abweichung zum erwartete Wert:

$$\sigma_{B_2^D} = 4.01$$

Durch Umstellen von Gl. 2 können wir die reduzierte Masse μ abschätzen:

$$\mu_{exp}^{D_2} = 1.079(19) \text{ u.}$$

Dieser Wert zeigt, ebenfalls, eine signifikante Abweichung zur erwartete Wert $\mu_{lit} = \frac{1}{2}m_D$:

$$\sigma_{\mu_2^D} = 3.74.$$

Die große Abweichungen werden später ausführlich besprechen.

2.2 Rotationsspektrum von ortho- und para-Wasserstoff

Zunächst, führen wir ein ähnliches Analyse wie bei Deuterium mit dem gemessenen Spektrum von ortho- und para-Wasserstoff durch.

Für die Bestimmung der erwartete Rotationskonstante und Wellenlängenummer der Raman-Linien verwenden wir folgende Werte für der Abstand von H_2 und Masse von H :

$$m_H = 1.00794 \text{ u}$$

$$r_{H_2} = 74 \text{ pm.}$$

Durch Einsetzen dieser Werte in Gl. 1 finden wir:

$$B_{lit}^{H_2} = 61.0841 \text{ cm}^{-1}$$

Analog wie bei letzten Abschnitt, passen wir ein Voigt-Distribution an jeder erkennbare Peak an und bilden die Fit-Funktion aus die Summe der einzelne Voigt-Fits. Als Wellenlängenummer wird die Position der Maxima der Distribution und der zugehörige Fehler angegeben. Das gemessene Spektrum von normal- H_2 zusammen mit der Fit-Funktion wird in Fig. 4 geplottet. Während das Spektrum der para- H_2 Probe wird in Fig. 5 dargestellt. Mithilfe dieses letzten Diagramm stellen wir fest, dass die Untergrundmessung der para- H_2 Probe nicht erfolgreich war, denn nachdem der Untergrundabzug durchgeführt wird, beobachten wir eine Verschiebung des Spektrums um c.a 43 a.E in der y-Achse.

Durch Vergleich der erwartete und gemessene Wellenlängenummer der Raman-Spektrum von Wasserstoff können wir die gefundene Peaks als die erste Rotationsanregungen erkennen. Die gemessene und erwartete Wellenlängenummer der Raman-Linien werden in Tab. 2

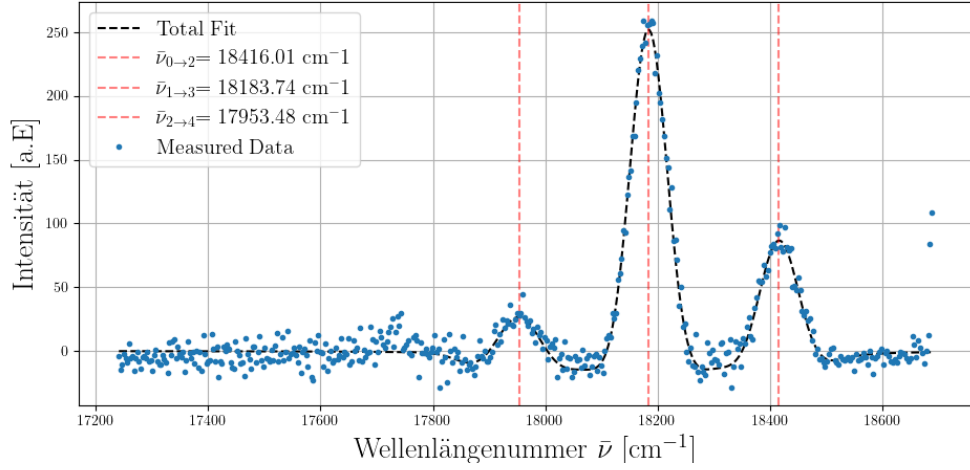


Figure 4: Raman-Spektrum von ortho-Wasserstoff. Gemessenen Spektrum eine normal-Wasserstoff Probe nach Untergrundabzug (blaue Punkte) mit Fit-Funktion (schwarze Linie). Die gefundene Raman-Linien sind durch gestrichelte rote Linien markiert.

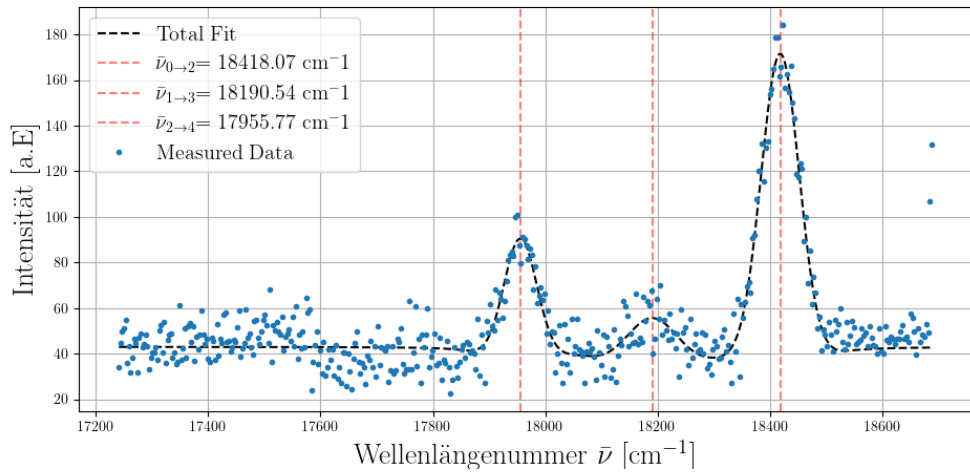


Figure 5: Raman-Spektrum von para-Wasserstoff. Gemessenen Spektrum eine normal-Wasserstoff Probe nach Untergrundabzug (blaue Punkte) mit Fit-Funktion (schwarze Linie). Die gefundene Raman-Linien sind durch gestrichelte rote Linien markiert.

Table 2: Wellenlängenummer der Raman-Linien von H_2 . Vergleich von erwartete und gemessene Werte einer para- und Normal-Wasserstoffprobe.

J	Intensität [a.E]		$\bar{\nu}_{J \rightarrow J+2}$ [cm^{-1}]			Abweichung σ	
	$H_2^{norm.}$	H_2^{para}	gem. $H_2^{norm.}$	gem. H_2^{para}	erwartet	$H_2^{norm.}$	H_2^{para}
0	5211(450)	10 035(577)	18 416(1)	18 418.1(10)	18325.08	91.8	116.12
1	16 699(395)	448(348)	18 183.7(4)	18 191(6)	18080.75	279.12	18.78
3	627(237)	2926(333)	17 953(2)	17 956(2)	17836.41	53.59	76.24

zusammengefasst und vergleicht. Zusätzlich, wird die Intensität der Raman-Linien in der selben Tabelle zusammengefasst um die Reinheit der para-Wasserstoff abzuschätzen.

Aus der Tabelle können wir lesen, dass erneut signifikanten Abweichungen zwischen die erwartete und gemessene Werte bei beiden Messreihen, bzw. normal- und para- H_2 , vorkommen.

Durch bestimmen der Abstand zwischen der gemessene Raman-Linien lassen sich zwei Werten für die Rotationskonstante und zwei Werte für die reduzierte Masse, welche wir in Tab. 3 zusammenfassen und vergleichen.

Table 3: Wellenlängenummer der Raman-Linien von H_2 . Vergleich von erwartete und gemessene Werte einer para- und Normal-Wasserstoffprobe.

Größe	Wert			Abweichung σ	
	$H_2^{norm.}$	H_2^{para}	H_2^{lit}	$H_2^{norm.}$	H_2^{para}
B [cm^{-1}]	57.8(3)	57.8(9)	61.0841	13.03	3.64
μ [u]	0.532(2)	0.5(3)	0.5004	15.8	0.001

2.3 Vibrationsanregung von Sauerstoff und Stickstoff